

Věc: Posudek disertační práce

Autor: Ing. Prokop Hapala

Název práce: Teoretické simulace transportu náboje v nanostrukturách

Studijní program a obor: Fyzika kondenzovaných látek a materiálový výzkum (4F3)

Rok odevzdání: 2016

Ing. Prokop Hapala zahájil doktorské studium ve Fyzikálním ústavu AV ČR v roce 2009. Ve své doktorské práci se zabýval teoretickým studiem atomární a elektronové struktury nanosystémů a její vliv na fyzikální a chemické vlastnosti studovaného systému, jakož i studium přenosu náboje.

Výsledky svého výzkumu P. Hapala prezentuje ve své disertační práci, která je doplněna o 6 stěžejních prací kandidáta. Každá tematika obsahuje stručný úvod a motivaci, popis dosažených výsledků a závěry. Doktorskou práci je možné rozdělit do 3 základních směrů: i) transport náboje v nanosystémech, ii) mechanismus vysokého rozlišení pomocí rastrovacích mikroskopů, iii) popis pásové struktury nanosystémů. Kandidát při řešení těchto témat prokázal velkou invenci a schopnost učit se nové metody a postupy. Zejména by jsem ocenil jeho schopnost samostatného tvůrčího myšlení.

V první části práce se P. Hapala zaměřil na implementaci programu Smeagol pro výpočet transportních vlastností nanosystémů pomocí nerovnovážných Greenových funkcí do programu Fireball. Následně použil nový program na analýzu tunelovacího proudu mezi molekulami oxidu uhlíku na hrotu a etylenu na povrchu mědi.

Druhá část práce se týká popisu mechanismu umožňujícího submolekulární rozlišení pomocí rastrovacích mikroskopů s flexibilními hroty. Zde kandidát navrhl originální model, který elegantně vysvětluje podstatu mechanismu zobrazení. Na základě tohoto modelu napsal program, který umožňuje provádět velmi efektivně počítačové simulace experimentálních obrázků rastrovacích mikroskopů. Dále prokázal význam elektrostatické síly na submolekulární kontrast a významně se také podílel na nové metodě, která umožňuje zobrazit lokální elektrostatické pole právě z experimentálních obrázků rastrovacích mikroskopů s vysokým rozlišením.

Ve třetí části se zaměřil na popis elektronové a atomární struktury křemíkových nanočástic, zejména pak na vliv povrchové pasivace. Za tímto účelem vyvinul originální metodu, který umožňuje rekonstruovat pásovou strukturu nanokrystalů. V rámci práce se zaměřil na pochopení vlivu povrchové pasivace na optické vlastnosti křemíkových nanokrystalů.

Kandidát prezentoval dosažené výsledky na řadě mezinárodních konferencí formou

přednášek, kde prokázal dobrou schopnost prezentace dosažených výsledků. Na většině článků, kde je uveden jako hlavní autor, se aktivně podílel na jejich psaní. Během doktorského studia publikoval celkem 20 prací v zahraničních časopisech s impakt faktorem, včetně PRL, ACS Nano nebo Nature Comm.. Další 3 články, na kterých se podílel, jsou nyní v recenzním řízení nebo před odesláním.

V rámci vědecké činnosti se také aktivně podílel na vývoji výpočetních *ab initio* metody Fireball na bázi teorie funkcionálu hustoty. Zejména se podílel na implementaci numerického řešení Poissonovy rovnice pomocí rychlé Fourierovy transformace.

Prokop Hapala prokázal během svého doktorského studia velkou schopnost rozvíjet nezávislý výzkum. To lze prokázat nejen sérií rukopisů, které publikoval jako první autor, ale i pověstí, kterou si získal mezi kolegy na pracovišti, stejně jako ve vědecké komunitě zabývající se pokročilou rastrovací mikroskopií. Jeho průkopnická díla vysvětlující mechanismus submolekulárního rozlišení pomocí rastrovacích mikroskopů zaznamenaly velkou odezvu v komunitě. V konečné fázi svého doktorského studia, také prokázal schopnost aktivně vést mladší kolegy ve vědecké činnosti. Ukázal nejen velmi dobré teoretické znalosti v oblasti fyzikálních a chemických procesů v nanosystémech, ale také schopnost snadné komunikace s kolegy experimentátory. Byl schopen nejen věcně objasnit experimentální data, ale také sám přicházel s novými řešeními a návrhy. Za jeho vynikající vědecké výsledky mu byla tento rok udělena Akademií věd cena O. Wichterle pro mladé vědecké pracovníky.

Závěrem lze konstatovat, že Ing. Prokop Hapala prokázal schopnost tvůrčí vědecké práce v oblasti fyziky pevných látek, nanostruktur a materiálových věd. Jeho publikační činnost i konferenční vystoupení jasně prokázaly, že jeho vědecká práce snese nejpřísnější mezinárodní měřítko. Jeho dizertační práce má vynikající odbornou úroveň. Proto doporučuji aby mu po úspěšné obhajobě byl udělen titul PhD.

V Praze dne 16. Srpna 2016

Ing. Pavel Jelínek PhD
školitel